UMA ABORDAGEM DE FUNÇÕES DE GREEN PARA ANÁLISE DE POLOS DE POTENCIAIS CONSTANTES POR PARTES

Alana S. dos Santos (PIBIC/FA), Alexandre Drinko (Coorientador),
Fabiano M. Andrade (Orientador)
e-mail: fmandrade@uepg.br

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Matemática e Estatística

Física, Física clássica e Física Quântica; Mecânica e Campos

Palavras-chave:
Poço de potencial duplo, estados ligados, funções de Green.

Resumo
O objetivo deste trabalho é estudar o poço de potencial duplo através da metodologia da função de Green, a qual é obtida através da soma de caminhos que uma partícula pode realizar, para uma dada energia, de um ponto a outro dentro do potencial. O poço de potencial duplo é um caso especial da classe de potenciais constantes por partes e, apesar de ser semiclássico, a metodologia utilizado é exata para potenciais constantes por partes. A partir da função de Green, podemos obter os autovalores de energia e as funções de onda, que são pontos essenciais no estudo da mecânica quântica. Ao final do trabalho, analisamos analiticamente um caso limite do poço duplo, que corresponde a um potencial delta de Dirac como potencial central.

Introdução

O poço de potencial duplo (PPD) é um dos sistemas de potenciais mais estudados na mecânica quântica devido a suas inúmeras aplicações. Esse sistema pode ser interpretado, por exemplo, como uma ligação covalente de moléculas de $H_2, N_2,$ e CO, onde cada poço representa um dos átomos em que o elétron compartilhado pode estar [1]. Neste trabalho, focamos no método de solução via função de Green.

O procedimento utilizado para obter a função de Green é no espírito da abordagem de Feynman, ou seja, através de somas de caminhos. Assim, a função de Green é dada por [2]

$$G_{f,i} = \frac{m}{i\hbar^2\sqrt{k_i k_f}} \sum_{es} W_{es} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{es}(x_f, x_i; E)\right], \quad (1)$$

onde W_{es} é a amplitude semiclássica e S_{es} é a ação clássica. O índice es indica que a soma é realizada sobre os caminhos de espalhamento. As W_{es} estão relacionadas aos efeitos quânticos locais por meio das amplitudes de reflexões e transmissões. O número de onda em cada região diferente é $k_j = \sqrt{2m(E-u_j)/\hbar}$, onde o termo u_j representa o potencial considerado.

Os autovalores de energia são obtidos através dos polos da função de Green e as funções de onda em cada um desse polos são obtidas dos resíduos da função de Green, o qual é dado por

$$\lim_{E \to E_n} (E - E_n) G(x_f, x_i; E) = \psi_n(x_f)\psi_n^*(x_i). \quad (2)$$

Material e Métodos

O potencial assimétrico da Figura 1 é definido matematicamente como

$$V(x) = \begin{cases} u_1, & x < -a \\ u_2, & -b < x < c \\ u_3, & x > a \\ 0, & -a < x < -b \; e \; c < x < a \end{cases}$$

O método utilizado para somar todos os caminhos de espalhamento é através da classificação de famílias de caminhos. Assim, uma partícula de massa m que se encontra inicialmente em x_i pode ir para a esquerda ou para a direita. Para o primeiro caso, ao se descolar para a esquerda, a partícula ganha uma contribuição $e^{ik_0(a-x_i)}$ e necessariamente reflete, ganhando uma amplitude de reflexão $R_{(-a)}^{(-)}$ no potencial u_1 em $x = -a$ e segue pela família de caminhos P_1. Para o segundo caso, quando se desloca para a direita, ganha uma contribuição $e^{ik_0(x_i-b)}$ e ao atingir o potencial em $x = -b$ de intensidade u_2, a partícula pode (a) ser refletida com amplitude $R_m^{(+)}$ e seguir pela família P_2; ou pode (b) ser transmitida com amplitude $T_m^{(+)}$ e seguir pela família P_3. Assim, pela prescrição acima, a função de Green pode ser escrita como

$$G_{f,i} = \frac{m}{i\hbar^2\sqrt{k_0 k_0}}\left[e^{ik_0(a-x_i)}R_{(-a)}^{(-)}P_1 + e^{ik_0(x_i-b)}R_m^{(+)}P_2 + e^{ik_0(x_i-b)}T_m^{(+)}P_3\right] \quad (3)$$

onde $k_0 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

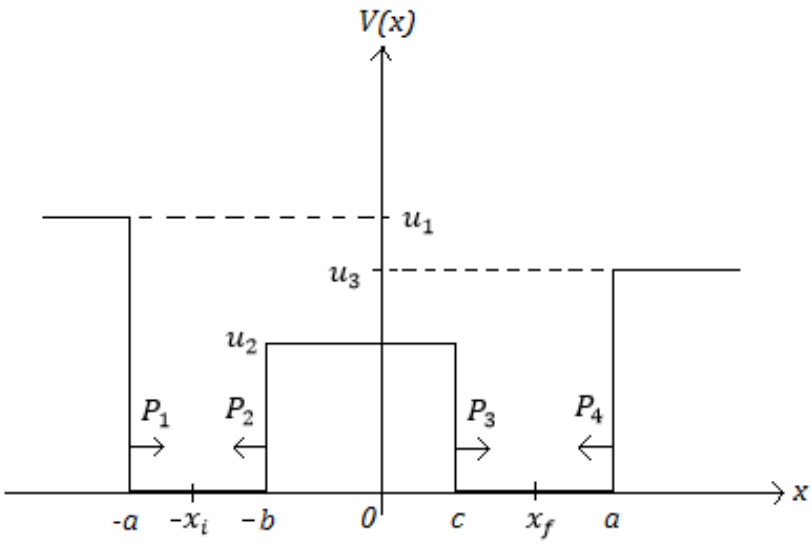


Figura 1: Representação das famílias de caminhos

A família P_1, que segue para a direita, ganha uma contribuição $e^{ik_0(a-b)}$ e possui duas contribuições ao atingir o potencial u_2: (a) é refletida com amplitude $R_m^{(+)}$ e segue pela família P_2; ou (b) é transmitida com amplitude $T_m^{(+)}$ e segue pela família P_3. Fazendo a mesma análise para as famílias P_2, P_3 e P_4, representadas na Figura 1, encontramos o seguinte sistema de equações

$$P_1 = e^{ik_0(a-b)}\left[R_m^{(+)}P_2 + T_m^{(+)}P_3\right]$$
$$P_2 = e^{-ik_0(-a+b)}R_{(-a)}^{(-)}P_1$$
$$P_3 = e^{ik_0(x_f-c)} + e^{ik_0(a-c)}R_{(+a)}^{(+)}P_4$$
$$P_4 = e^{-ik_0(x_f-a)} + e^{-ik_0(c-a)}[R_m^{(-)}P_3 + T_m^{(-)}P_2]$$

Ao resolver esse sistema de equações e substituir na equação (3), obtemos que a função de Green para o poço duplo é

$$G(x_f,x_i;k) = \frac{m}{i\hbar^2 k_0}\frac{T_m^{(+)}}{f_{aw}}\left[e^{ik_0(x_f-c)} + e^{ik_0(a-c)}R_{(+a)}^{(+)}e^{ik_0(a-x_f)}\right]\times \left[e^{ik_0(a-x_i)}R_{(-a)}^{(-)}e^{ik_0(a-b)} + e^{ik_0(x_i-b)}\right] \quad (4)$$

onde

$$f_{aw} = \left[1 - R_m^{(+)}R_{(-a)}^{(-)}e^{2ik_0(a-b)}\right]\left[1 - R_m^{(-)}R_{(+a)}^{(+)}e^{2ik_0(a-c)}\right] - T_m^{(-)}T_m^{(+)}R_{(-a)}^{(-)}R_{(+a)}^{(+)}e^{2ik_0(a-b)}e^{2ik_0(a-c)}. \quad (5)$$

As amplitudes $R_m^{(\pm)}$ e $T_m^{(\pm)}$ devem ser determinados de acordo com a barreira de potencial u_2; já as amplitudes $R_{(-a)}^{(-)}$ e $R_{(+a)}^{(+)}$ devem ser determinadas pelos potenciais u_1 e u_3,respectivamente. Um caso interessante para análise, que pode ser visto com um caso limite de um PPD onde a largura da barreira u_2 tende para zero e a altura tende para infinito mantendo a área embaixo do potencial finita, é utilizar uma delta de Dirac para representar a barreira u_2. Vamos considerar o potencial da delta de Dirac da seguinte forma

$$V(x) = \alpha\,\delta(x)$$

onde α é um parâmetro que controla a opacidade da delta. Por exemplo, para $\alpha = 0$ (opacidade nula) não temos a delta e retornamos ao caso de um poço de potencial quadrado simples e para $\alpha \neq 0$ temos uma barreira, de modo que, teremos dois poços de potenciais separados. Para as amplitudes $R_m^{(\pm)}$ e $T_m^{(\pm)}$ na delta de Dirac, devemos considerar como condições de contorno que as funções de onda são contínuas e suas derivadas descontínuas, de forma que encontramos

$$R_m^{(+)} = R_m^{(-)} = -\frac{i\beta}{1+i\beta} \quad (6)$$
$$T_m^{(+)} = T_m^{(-)} = \frac{1}{1+i\beta}. \quad (7)$$

onde $\beta = m\alpha/\hbar^2 k_0$.

Resultados e Discussão

Para a análise do poço duplo com a delta de Dirac, devemos fazer $b = c = 0$ e o potencial u_2 tender para o infinito. Por simplificação, consideramos $u_1 = u_3$, de modo que

$$R_{(+a)}^{(+)} = R_{(-a)}^{(-)} = \frac{k_0-k_1}{k_0+k_1}. \quad (8)$$

Assim, substituindo as equações (6), (7) e (8) nas equações (4) e (5), temos que a função de Green com a delta de Dirac é dada por

ISSN 1676-0093

$$G(x_f,x_i;k)=\frac{m}{i\hbar^2k_0f_{aw}}\left(\frac{1}{1+i\beta}\right)\left[e^{ik_0x_f}+e^{ik_0a}\left(\frac{k_0-k_1}{k_0+k_1}\right)e^{ik_0(a-x_f)}\right]\times \left[e^{ik_0(a-x_i)}\left(\frac{k_0-k_1}{k_0+k_1}\right)e^{ik_0a}+e^{ik_0x_i}\right] \quad (9)$$

onde os polos da função de Green são dados por $f_{aw}=0$, ou seja

$$\left[1+\left(\frac{i\beta}{1+i\beta}\right)\left(\frac{k_0-k_1}{k_0+k_1}\right)e^{2ik_0a}\right]^2-\left(\frac{1}{1+i\beta}\right)^2\left(\frac{k_0-k_1}{k_0+k_1}\right)^2e^{4ik_0a}=0. \quad (10)$$

A partir da equação (10) é possível analisar o fluxo de polos, ou seja, como que ocorre a dinâmica dos polos no plano complexo à medida que variamos algum parâmetro do PPD. Podemos, também, extrair informações como as autoenergias do sistema.

É possível encontrar as funções de onda a partir dos resíduos da função de Green calculando o limite da equação (2), ou seja

$$\lim_{E\to E_n}\frac{(E-E_n)}{f_{aw}}=\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{k\to k_n}\frac{(k^2-k_n^2)}{f_{aw}}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{k_n}{f_{aw}^{\prime(n)}} \quad (11)$$

onde $f_{aw}^{\prime(n)}=\left(\frac{df_{aw}}{dk}\right)$ calculada em $k=k_n$ que representa um polo da função de Green. Usando esses valores para o polo, obtemos na equação (9) o seguinte resultado:

$$\psi_n(x_f)[\psi_n(x_i)]^* = \frac{\hbar^2}{2m}\lim_{k\to k_n}(k^2-k_n^2)G_{f,i},=\frac{1}{if_{aw}^{\prime(n)}}\left(\frac{1}{1+i\beta}\right)\left[e^{ik_0x_f}+e^{ik_0a}\left(\frac{k_0-k_1}{k_0+k_1}\right)e^{ik_0(a-x_f)}\right] \times\left[e^{ik_0(a-x_i)}\left(\frac{k_0-k_1}{k_0+k_1}\right)e^{ik_0a}+e^{ik_0x_i}\right]$$

Logo, a função de onda é dada por

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{1}{if_{aw}^{\prime(n)}}}\left(\frac{1}{1+i\beta}\right)\left[e^{ik_0x}+e^{ik_0a}\left(\frac{k_0-k_1}{k_0+k_1}\right)e^{ik_0(a-x)}\right]. \quad (12)$$

Conclusão

Para potenciais constantes por partes, caso em que o poço duplo se encaixa, a função de Green semiclássica é exata e possui uma abordagem matemática bastante simples, uma vez que utilizamos o método de classificação de famílias de caminhos para obtê-la. O poço de potencial duplo possui inúmeras aplicações na física quântica, por isso o interesse em se estudar esse tipo de sistema. Analisamos, ainda, um caso limite do sistema colocando uma delta de Dirac no potencial central. Assim, encontramos a função de Green, os polos e a função de onda para este caso.

Agradecimentos

Agradeço à Fundação Araucária pelo suporte financeiro para a realização deste projeto e ao professor Fabiano Manoel de Andrade pela orientação.

Referências

[1] TIPLER, P. A.; LLEWELLYN, R. A. **Modern Physics**. 5 ed. New York: W. H. Freeman and Company, 2008.

[2] ANDRADE, F. M. **Exact Green's function for rectangular potentials and its applications to quasi-bound states**. *Phys. Lett. A* **378**, 1461, 2014.